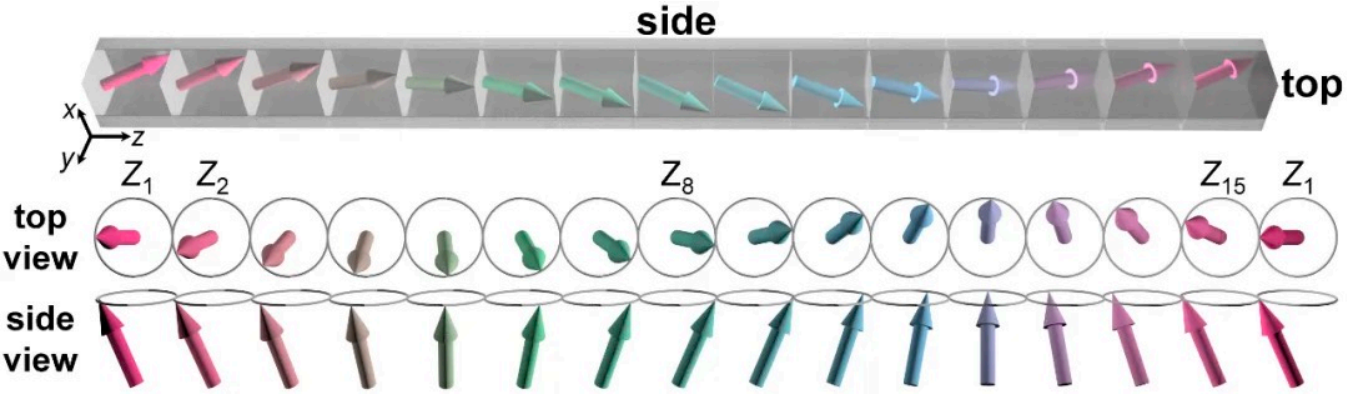
西湖大学团队发现新型螺旋铁电结构

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/28556.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

西湖大学团队发现新型螺旋铁电结构。7月26日，西湖大学理学院物理系特聘研究员刘仕团队在《物理评论快报》上发表了最新研究成果，并入选编辑推荐。该研究利用基于机器学习的分子动力学方法，揭示了在经典铁电材料钛酸铅中，通过施加适当的应变，可以诱导出一种新型的螺旋铁电结构，这种结构展现出巨大的压电效应。



铁电螺旋示意图。课题组供图

?

铁电材料指的是在没有外加电场下，具有自发电荷极化的材料。钛酸铅（PbTiO3）作为最典型的铁电材料之一，其物理特性和应用前景一直是研究热点。然而，传统的铁电材料研究主要集中在其静态结构和性质上，对其动态行为和复杂畴结构的探索相对较少。

刘仕团队采用了密度泛函理论（DFT）和基于机器学习的分子动力学模拟相结合的方法。通过这种方法，他们不仅能够预测材料的性质，还能够模拟大量原子在温度和电场共同作用下的集体行为，从而揭示材料的动态结构和性能。

研究发现，在钛酸铅中施加适当的应变可以诱导出一种螺旋铁电结构。这种结构中的电偶极子在三维空间中形成了螺旋排列，展现出高度关联的动态行为。这种螺旋结构展现出了比传统多畴结构更优异的压电性能，其压电系数甚至可以超过320
pC/N。这一发现为提升铁电材料的压电效应提供了新的机制。

研究强调了动态结构在材料性能中的重要性。通过模拟原子的集体行为，团队揭示了钛酸铅在压电效应上的潜藏优越性，并提出了利用拓扑结构提升压电性能的新手段。

这项研究不仅在物理层面上发现了铁电体系中的螺旋拓扑结构，还在科学方法论上展示了AI辅助的分子动力学在揭示材料新物理性质中的应用前景。同时，这项工作也为未来在手性声子、非共线铁电拓扑等方面的研究提供了新的思路。

西湖大学理学院物理系博士生胡逸豪为论文第一作者，刘仕为论文通讯作者，博士生杨季元在分子动力学方面提供了重要帮助。（来源：中国科学报 温才妃 刘逸飞）

相关论文信息：https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.133.046802

作者：刘仕等 来源：《物理评论快报》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发